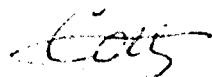


0- 790955

На правах рукописи



Сачков Виктор Анатольевич

**ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ  
РЕАЛЬНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ GaAs/AlAs МЕТОДОМ ЧИСЛЕННОГО  
ЭКСПЕРИМЕНТА**

Специальность 01.04.10  
(физика полупроводников)

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Омск – 2011

Работа выполнена в Омском филиале Института физики полупроводников  
им. А.В. Ржанова Сибирского отделения РАН

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук,  
профессор Болотов Валерий Викторович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,  
профессор Караваев Геннадий Федорович  
кандидат физико-математических наук,  
доцент Катаев Сергей Григорьевич

Ведущая организация: Институт неорганической химии им. А.В. Николаева  
Сибирского отделения РАН (г. Новосибирск)

Защита состоится "22" декабря 2011 года в 15-30 на заседании диссертационного  
совета Д 212.267.07 при Томском государственном университете по адресу 634050,  
г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Томского государственного  
университета

Автореферат разослан "11" ноября 2011 года

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физико-математических наук

НАУЧНАЯ БИБЛИОТЕКА КГУ



0000688381

И.В. Ивонин

*1160*

**Общая характеристика работы**

Диссертация посвящена изучению динамики решетки в системе реальных полупроводниковых нанообъектов, самоорганизующихся в объеме и на границе раздела гетероструктур на основе GaAs/AlAs. Основное внимание уделено изучению локализации оптических фононов в нанообъектах и эффектов фонон-плазмонного взаимодействия в легированных наноструктурах. Научная новизна данной работы заключается в исследовании свойств локализованных фононов, связанных с дополнительной симметрией, которая появляется под действием внутренних сил в процессах самоорганизации реальных структур, выращенных со специально заданными характеристиками.

**Актуальность проблемы.** Прогресс в области физики полупроводников в значительной степени обусловлен возможностями создания и исследования объектов пониженной размерности с квантовыми свойствами. Достижения современной науки и технологии позволяют создавать полупроводниковые объекты нанометровых масштабов – сверхрешетки (СР), квантовые проволоки и квантовые точки. Методика комбинационного рассеяния света (КРС) является одной из самых востребованных для исследования таких объектов [1]. Большие надежды по созданию квантовых проволок и точек возлагаются на технологии, использующие их самоорганизацию в условиях гетероэпитаксиального роста, фазовых переходов и разделения фаз в гетерофазных системах [2,3]. Примером использования эффектов самоорганизации на границах раздела является формирование квантовых проволок GaAs в процессе гетероэпитаксиального роста СР GaAs/AlAs на фасетированных поверхностях с большими индексами Миллера [3,4]. Так, поверхности (311)A GaAs и AlAs в определенных условиях расщепляются на периодический массив микроканалов с латеральным периодом 3.2 нм [4]. Латеральные размеры проволок при этом воспроизводимы и определяются расстоянием между фасетками, их толщина задается условиями роста. Гетероструктуры на основе соединений  $A^{III}-B^V$  находят широкое применение в быстродействующих приборах для телекоммуникаций, оптоэлектронных приборах и лазерах [2]. Качество гетерограниц оказывает существенное влияние на свойства этих приборов, поэтому актуально исследование структуры гетерограниц. Влияние структурных реконструкций поверхности на свойства гетероструктур представляет большой интерес. Такие структурные реконструкции активно исследуются методами дифракции быстрых электронов и сканирующей туннельной микроскопии [5]. Большой интерес представляет исследование влияния реконструкции поверхности на структуру квантовых объектов, формирующихся на ней на начальном этапе гетероэпитаксиального роста. Исследования нанообъектов методом спектроскопии КРС в сочетании с численным экспериментом позволяют получить информацию об их форме, среднем размере и дисперсии по размерам, об их ориентации в случае появления эффекта выделенной ориентации, о величине механических напряжений в тонких пленках, о

наличии структурной анизотропии, о качестве гетерограниц. В соответствии с этим исследования по изучению моделирования фоновых свойств нанобъектов являются актуальными.

**Целью работы** является исследование КРС в массивах квантоворазмерных объектов на основе GaAs с анализом их структуры и процессов самоорганизации. Для достижения данной цели методом вычислительного эксперимента решались следующие задачи:

1. Провести исследование влияния гетерограницы на оптические фоновые моды, активные в КРС для островков GaAs, окруженных матрицей AlAs, формирующихся при субмонослойном росте в условиях структурной перестройки поверхности (100) GaAs.

2. Провести исследование анизотропии оптических фононов, локализованных в массиве квантовых проволок GaAs, формирующихся на фасетированной поверхности (311)A.

3. Определить механизм делокализации фонов-плазменных мод в плоских легированных CP GaAs/AlAs с тонким слоем AlAs.

4. Определить влияние анизотропии электронного газа в CP GaAs/AlAs (001) с ультратонкими слоями AlAs на анизотропию смешанных фоновых мод.

#### **Научная новизна работы**

1. Определена совокупность нанобъектов, вызывающих триплетную структуру пиков продольных оптических фононов в спектрах КРС CP GaAs/AlAs, содержащих субмонослои GaAs, формирующиеся в условиях структурной перестройки (2x4) поверхности (100) GaAs.

2. Показано, что различие частот локализованных в квантовых проволоках GaAs поперечных оптических фононов с направлением колебаний атомов вдоль и поперек квантовых проволок, обнаруженное в эксперименте, объясняется конечной длиной реальных массивов проволок.

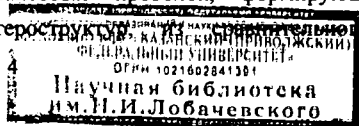
3. Предложена модель «квазитрехмерного» электронного газа для объяснения обнаруженного увеличения частоты линии КРС для AlAs-подобной моды и понижения частоты GaAs-подобной моды в легированных ультратонких плоских CP относительно нелегированных.

4. Предсказана угловая дисперсия для фонов-плазменных мод в легированных ультратонких плоских CP вследствие снятия вырождения тензора обратной эффективной массы электронов.

#### **Практическая значимость работы**

1. Определена структура и состав островков GaAs в реальной гетероструктуре GaAs<sub>0.6</sub>/AlAs<sub>0.4</sub>(001) на основе численного моделирования спектров КРС.

2. Предложен метод определения наличия дефектов в гетероструктурах GaAs/AlAs(311)A и оценки длины квантовых проволок, формирующихся при гетероэпитаксиальном росте таких гетероструктур.



рассчитанных и экспериментальных спектров КРС.

3.Из данных КРС и проведенных расчетов определена толщина барьера AlAs в легированных CP GaAs/AlAs(001), при которой становятся существенными эффекты туннелирования электронов.

4.Разработан метод оценки концентрации свободных носителей заряда в CP GaAs/AlAs(001) из анализа спектров КРС на основе модели фонон-плазмонного взаимодействия в легированных гетероструктурах полярных полупроводников.

5.Создан пакет программного обеспечения для расчета фононного и КРС спектров гетероструктур произвольной геометрической конфигурации.

### **Положения, выносимые на защиту**

1.Латеральная локализация оптических фононов в квантовых островках GaAs, формирующихся на реконструированной поверхности AlAs, приводит к появлению дополнительных фононных мод, активных в КРС, с частотами, зависящими от количества атомов в островке.

2.Поперечные оптические фононы, локализованные в квантовых проволоках GaAs, самоорганизующихся на фасетированной поверхности (311)A, расщепляются по энергии вследствие структурной анизотропии латеральных CP, содержащих периодический массив квантовых проволок конечной длины.

3.В легированных CP с туннельно-тонким барьером AlAs фонон-плазмонное взаимодействие является одним из доминирующих механизмов, влияющих на форму линий КРС. Фонон-плазмонное взаимодействие становится возможным вследствие увеличения вероятности туннелирования свободных электронов до такой степени, что электронный газ становится «квазитрехмерным».

4.Снятие вырождения тензора обратной эффективной массы свободных электронов, происходящее вследствие структурной анизотропии, вызывает угловую дисперсию для фонон-плазмонных мод в легированных CP с туннельно-тонким барьером AlAs.

### **Структура и объем диссертации**

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, выводов, заключения и библиографического списка. Содержит 150 страниц, 37 рисунков на 31-ой страницах, 2 таблицы на 1-ой странице, 138 библиографических ссылок на 17-ти страницах.

### **СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** обоснована актуальность работы, сформулирована цель работы и ее задачи, приведены выносимые на защиту положения, отмечена научная новизна работы и ее практическая значимость.

**Первая глава** посвящена анализу литературных данных об оптических свойствах квантовых объектов на основе арсенидов галлия и алюминия. Важную часть методики КРС составляет теоретическая обработка экспериментальных спектров. Рассмотрены

основные феноменологические методы анализа динамики СР:

1.Континуальные модели динамики решетки для многокомпонентных систем. Упругая континуальная модель и макроскопическая модель электрического поля для многокомпонентной системы хорошо подходят для описания акустических и оптических фононов в толстых плоских СР [1]. Приближения этих моделей становятся нефизичными для СР с ультратонкими слоями.

2.Модель альтернативной линейной цепочки – достаточно простая и хорошо описывает ряд процессов в СР. Но для более сложных квантовых объектов, таких как квантовые точки, квантовые проволоки, слоистые структуры со сложной гетерограницей, приближения данной модели становятся недопустимыми.

3.Трехмерное феноменологическое атомистическое моделирование. Не смотря на относительную сложность данного метода, он оказался наиболее подходящим для решения поставленных задач. Для анализа спектров КРС гетероструктур в нашей работе был выбран метод, основанный на атомистическом феноменологическом подходе для динамики в трехмерной решетке. Данный метод расчета спектров КРС для гетероструктур состоит из нескольких этапов:

а) Построение феноменологической модели межатомного взаимодействия и подгонка параметров модели. Рассмотрены основные модели, используемые в литературе: модель Борна, модель жестких ионов, модель Китинга, модель адиабатических зарядов на связи Вебера, оболочечная модель.

б) Расчет динамической матрицы гетероструктуры на основе п. 1 и расчет фононных спектров. В литературе хорошо себя зарекомендовал метод замещения масс. Он основывается на том, что чаще всего основные особенности фононных спектров в гетероструктурах обусловлены различием масс ионов, и в первом приближении для кристаллов с родственным типом химической связи можно пренебречь отличиями силового поля.

в) Построение модели поляризуемости изучаемой среды и подгонка параметров модели. Расчет производной по атомному смещению тензора поляризуемости. Построение теоретических спектров КРС.

4.Рассмотрены известные в литературе оптические и фононные свойства квантовых проволок и квантовых точек на основе GaAs.

**Во второй главе** описаны методы и приближения, использованные в представленной работе.

В качестве модели межатомного взаимодействия использовались:

1.Модель Борна – потенциал взаимодействия только двухчастичный и зависит только от длины связи между частицами.

2.Модель жестких ионов учитывает электростатическое взаимодействие точечных

недеформируемых зарядов. Для расчета вклада в динамическую матрицу дальнегодействующего кулоновского взаимодействия использовался метод Эвальда.

3. Для оценки достоверности полученных результатов в качестве альтернативной модели межатомного взаимодействия использовалась модель адиабатических зарядов на связи Вебера. Эта модель позволяет учитывать отклонение от сферической формы распределения электронной плотности вокруг ионных остовов путем введения дополнительных зарядов. Взаимодействия зарядов между собой и ионами учитываются с использованием моделей Борна, Китинга и модели жестких ионов. Использование адиабатического приближения позволяет исключить степени свободы, создаваемые зарядами. Параметры модели были найдены путем подгонки расчетной частотной фононной дисперсии к экспериментальным данным нейтронной спектроскопии для GaAs [6] вдоль основных направлений высокой симметрии зоны Бриллюэна. Подгонка производилась с использованием методов наименьших квадратов и градиентного спуска.

Расчет динамической матрицы производился в приближении замещения масс с использованием метода конволюции (свертки). Расчет тензора поляризуемости производился на основе метода аддитивной поляризуемости связи Волькенштейна. Этот метод построен на квазистатическом адиабатическом приближении и предположении, что каждая ковалентная связь имеет свою поляризуемость, являющуюся функцией только длины этой связи.

Численные расчеты производились пакетом программного обеспечения, созданным на языке программирования Fortran.

**Третья глава** посвящена исследованию зависимости спектральных свойств экспериментальных структур  $\text{GaAs}_n/\text{AlAs}_m$  от геометрической конфигурации нелегированных нанобъектов.

Параграф 3.1 посвящен поиску структурных особенностей гетероструктуры  $\text{GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_5$ , которая была выращена методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на полупроводниковой подложке GaAs (001) с буферным эпитаксиальным слоем GaAs толщиной 0.1  $\mu\text{m}$ . Температура подложки составляла 550°C, а потоки атомов Ga, Al и As были подобраны таким образом, что условия были предпочтительны для реконструкции (2x4), что и наблюдалось по данным дифракции быстрых электронов. После каждой стадии эпитаксии Ga структура выдерживалась некоторое время в вакууме, чтобы остались только стабильные конфигурации островков. Сверхрешетка содержала 400 периодов и была покрыта сверху защитным слоем GaAs.

На рисунке 1 приведены спектры КРС сверхрешетки  $\text{GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_5$  при возбуждении линиями Ar лазера 514.5, 496.5, 488, и 476.5 нм. Спектры КРС регистрировались при комнатной температуре в геометрии квазиобратного рассеяния  $z[xy]\bar{z}$  с разной длиной волн возбуждения рассеяния.

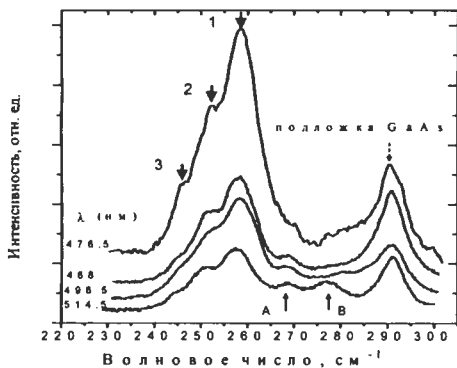


Рис. 1. Спектры КРС сверхрешетки  $\text{GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_{0.4}$ .

свойства квантовых островков GaAs, формирующихся при субмонослойном покрытии поверхности AlAs (001) в условиях структурной реконструкции (2x4). Было предположено, что появление в спектрах КРС дополнительных пиков обусловлено латеральной локализацией оптических фононов в квантовых островках GaAs. Были произведены расчеты собственных частот и векторов поляризаций в островках GaAs различных

Влияние структуры гетерограницы на фоновый спектр квантовых объектов становится значимым, если их размер в направлении роста меньше масштаба корrugации гетерограницы. Известно, что поверхность полупроводников типа  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  в условиях структурной реконструкции (2x4) представляет собой 2 цепочки димеров мышьяка, разделенных “траншеями” из двух вакансий, вытянутыми вдоль направления  $[1\bar{1}0]$ . Методом численного эксперимента были исследованы фоновые

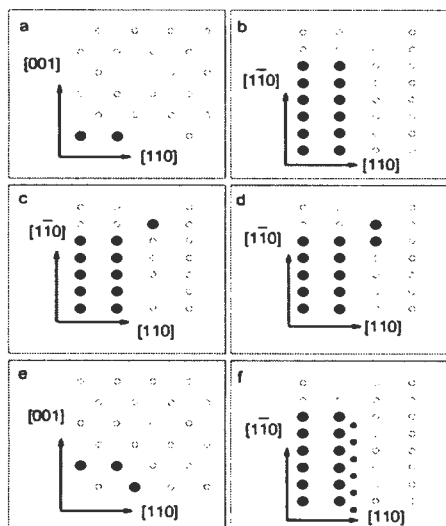


Рис. 2. Конфигурации квантовых островков GaAs. Темными кружками показаны атомы Ga, светлыми – атомы Al (атомы As не показаны, чтобы не усложнять картину).

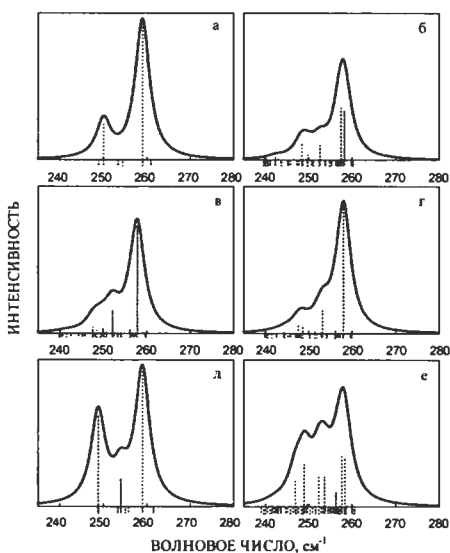


Рис. 3. Рассчитанные спектры КРС квантовых островков GaAs (конфигурации изображены на рисунках 3.2 a, e).



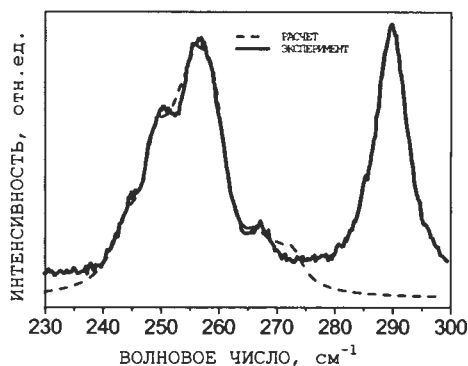


Рис. 4. Экспериментальный и рассчитанный спектры КРС для  $\text{CP GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_5$ , выращенной на реконструированной поверхности (001).

туннельной микроскопии [5]. Таким образом, нами была впервые обнаружена латеральная локализация оптических фононов в островках GaAs. Согласно расчетам, 70% островков содержат менее 12 атомов Ga, а латеральная локализация оптических фононов GaAs-типа происходит при толщине барьеров AlAs в 2 монослоя и более.

В гетероструктурах на основе GaAs/AlAs, выращенных на поверхности (311)A, было обнаружено расщепление локализованных GaAs-подобных поперечных оптических (ТО) фононов с направлениями смещений вдоль ( $\text{TO}_y$  мода) и поперек ( $\text{TO}_x$  мода) квантовых проволок (рис. 5). Параграф 3.2 посвящен поиску совокупности структурных особенностей объектов, вызывающих данное расщепление. В рассматриваемом случае не удается однозначно найти конфигурацию объектов, исходя исключительно из анализа

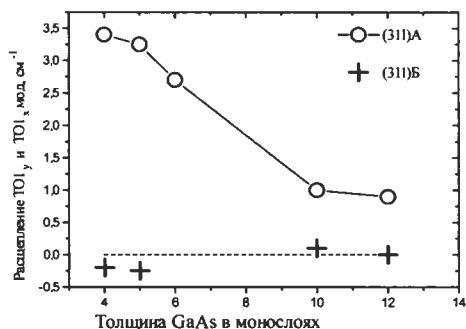


Рис. 5. Расщепление частот мод  $\text{TO}_y$  и  $\text{TO}_x$  в зависимости от средней толщины слоев GaAs в CP, выращенных на поверхностях (311)A и (311)B.

конфигураций (рис. 2), окруженных AlAs, и соответствующие спектры КРС (рис. 3). Было предположено, что в изучаемом образце эти островки присутствуют с разными коэффициентами заполнения. Подгонка этих коэффициентов делалась путем минимизации суммы квадратов разницы между точками рассчитанного и экспериментального спектров КРС. Результат подгонки представлен на рисунке 4. Полученные из анализа спектра КРС данные о конфигурациях островков (рис. 2) совпадают с известными данными, полученными методом сканирующей

КРС, как в §1. Поэтому за основу при моделировании структуры из литературы [4] была взята следующая модель. При гетероэпитаксиальном росте на фасетированной поверхности (311)A происходит формирование периодического массива квантовых проволок GaAs, с латеральным периодом 3.2 нм в кристаллографическом направлении  $[01\bar{1}]$ . При заполнении слоя GaAs, количественно равным 6 монослоям и менее, корругированные границы, согласно этой модели, соединяются и образуются

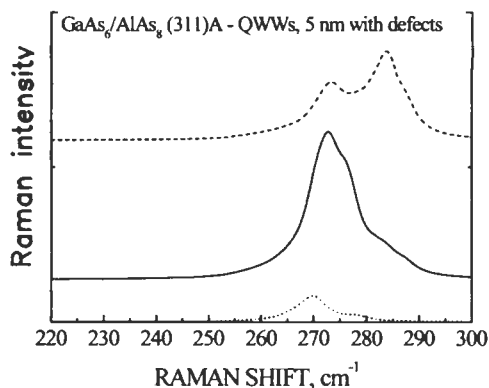


Рис. 6. Рассчитанные спектры КРС спектры КРС для  
квантовой проволоки GaAs ограниченной длины.

квантовые проволоки вдоль направления  $[2\bar{3}3]$ . Как видно из рисунка 5, наибольшее расщепление проявляется именно в этих случаях. Численные расчеты показали, что идеальные квантовые проволоки в направлении  $(2\bar{3}\bar{3})$  дают расщепление, обратное наблюдаемому в эксперименте. Был поставлен ряд численных экспериментов, в которых проволока модифицировалась множеством различных способов. В результате этих расчетов установлено (рис. 6), что расщепление, соизмеримое с

экспериментальным, в рамках выбранной модели корrugации возможно только при таких особенностях структуры проволоки, при которых GaAs-подобный фонон локализуется в объеме, ограниченном в направлении  $(2\bar{3}\bar{3})$  4 нм, что и было подтверждено в работе [7] методом просвечивающей электронной микроскопии с высоким разрешением.

Таким образом, было установлено, что расщепление ТО фононов в массиве квантовых проволок GaAs на поверхности (311)A в рамках имеющихся в литературе моделей корrugации возможно при условии ограниченности длины квантовых проволок, т.е. в расчете и эксперименте проявляется реальная структура квантовых проволок и дефекты роста.

**Четвертая глава** посвящена исследованию делокализации фонон-плазмонных мод в СР GaAs/AlAs с туннельно-тонкими барьерами AlAs при переходе от отдельных (связанных только кулоновским взаимодействием) периодических слоев 2D электронного газа к туннельно-связанным слоям.

На протяжении многих лет внимание исследователей привлекают эффекты взаимодействия фононов с другими квазичастицами в твердых телах [8]. Существует большое количество теоретических работ, посвященных расчетам плазменных колебаний в СР. Однако к моменту выполнения нашей работы не было опубликованных исследований по изучению процессов фонон-плазмонного взаимодействия в туннельно-тонких СР.

**Параметры роста исследуемых образцов.** Набор нелегированных и легированных СР GaAs/AlAs был изготовлен с применением метода молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке GaAs с ориентацией (001). Толщина слоев AlAs менялась от половины монослоя до 17 монослоев, толщина слоев GaAs - от 5 до 25 монослоев. Рост осуществлялся при температуре подложки 550°C в условиях структурной перестройки типа (2x4) для

поверхностей как GaAs, так и AlAs, что контролировалось методом дифракции быстрых электронов. Некоторые СР были однородно легированы кремнием, концентрация которого составляла  $2.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , что, по оценкам, при комнатной температуре дает объемную концентрацию электронов  $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Все СР были покрыты защитным слоем GaAs толщиной 50 ангстрем.

Параграф 4.1 посвящен исследованию влияния механизма туннелирования в зависимости от толщины слоев AlAs. На спектрах КРС легированной СР GaAs<sub>17</sub>/AlAs<sub>17</sub> (50 периодов) нет пиков в областях фонон-плазмонных мод объемных материалов. Пики КРС в легированной СР немного сдвинуты относительно пиков аналогичной нелегированной СР в сторону меньших частот. Следовательно, легирование в этом случае не приводит к заметному изменению спектра КРС. Известно, что дисперсия 2D электронного газа, связанного кулоновским взаимодействием, такова, что при нулевой проекции волнового вектора на плоскость, частота плазмона стремится к нулю [9]:

$$\omega_{2D\text{Plasm}} = \left( \frac{2\pi \cdot N_s \cdot e^2}{\epsilon_M \cdot m^*} \cdot k_{||} \cdot \frac{\sinh(k_{||}d)}{\cosh(k_{||}d) - \cos(k_{\perp}d)} \right)^{1/2} \quad (1)$$

где  $\epsilon_M$  – диэлектрическая проницаемость среды, окружающей 2D электронный газ (в нашем случае – эффективная диэлектрическая проницаемость СР),  $d$  – период СР,  $k_{\perp}$  – компонента волнового вектора, перпендикулярная СР,  $k_{||}$  – компонента волнового

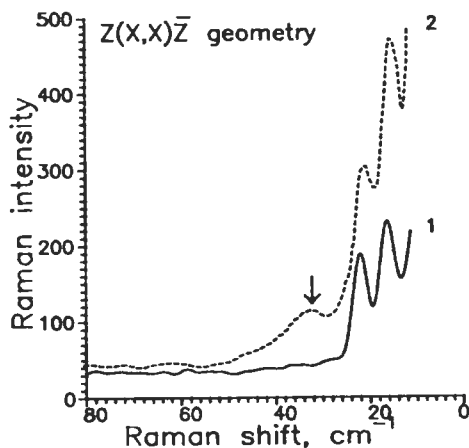


Рис. 7. Спектры КРС (T=300K) нелегированной (непрерывная линия) и легированной (штриховая линия) GaAs<sub>17</sub>/AlAs<sub>17</sub> СР. Стрелкой показана рассчитанная частота 2D плазмона.

вектора, параллельная плоскости 2D электронного газа ("in plain vector"). На рисунке 7 представлены спектры КРС нелегированной и легированной СР GaAs<sub>17</sub>/AlAs<sub>17</sub> в акустической области частот. Угол между волновыми векторами падающего и рассеянного фотонов составлял 90°. В этой геометрии рассеяния перпендикулярная составляющая волнового вектора, с учетом показателя преломления СР, равна  $10^6 \text{ см}^{-1}$ , параллельная компонента волнового вектора составляет  $7.1 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ . В спектре нелегированной СР виден дублет вследствие рассеяния на свернутых ("folded") продольных акустических (LA)

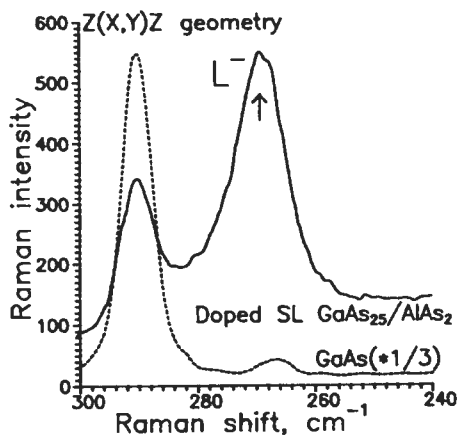


Рис. 8. Спектры КРС ( $T=300\text{K}$ ) легированной CP  $\text{GaAs}_{25}/\text{AlAs}_2$  (непрерывная линия) и объемного GaAs (штриховая линия).

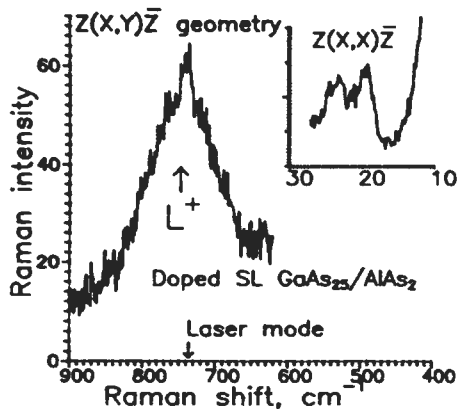


Рис. 9. Спектр КРС ( $T=300\text{K}$ ) легированной CP  $\text{GaAs}_{25}/\text{AlAs}_2$  в диапазоне частот  $L^+$  моды. На вставке – спектр того же образца в акустической области.

модах. В спектрах легированной CP помимо некоторого сдвига дублета в область меньших частот ясно наблюдается пик с положением примерно  $33\text{ см}^{-1}$ . Частота 2D плазмона, рассчитанная по формуле (1) в приближении  $k_{||} \cdot d \ll 1$ , равна  $35\text{ см}^{-1}$ , что соответствует экспериментально наблюдаемому значению. Наблюдаемое смещение LA1 дублета в легированной CP может быть следствием взаимодействия свернутых LA фононов с 2D плазмонами. Следовательно, здесь можно говорить о случае изолированных слоев 2D электронного газа.

На рисунках 8 и 9 представлены спектры  $\text{GaAs}_{25}/\text{AlAs}_2$  CP (50 периодов), легированной кремнием с той же концентрацией, что и ранее исследованные CP. На рисунке 8 для сравнения приведен спектр объемного полужолирующего GaAs. В спектре легированной CP видна интенсивная фонон-плазменная  $L^-$  мода (рис.8). Пик с максимумом в районе  $290\text{ см}^{-1}$ , по-видимому, обусловлен рассеянием от нелегированного защитного слоя GaAs (который для этой CP был толще, чем обычно, и составлял 400 ангстрем). Для данной CP также обнаружен широкий пик (рис. 9) с максимумом примерно  $750\text{ см}^{-1}$ . Следовательно, можно утверждать, что имеет место делокализация фонон-плазменных мод для CP с такими барьерами AlAs. На спектре КРС в акустической области (вставка к рисунку 9) виден дублет от свернутой моды первого порядка – LA1. Для точного определения периода CP было проведено численное моделирование фононного спектра. На рисунке 10 представлена рассчитанная дисперсия акустических и оптических нечетных продольных мод в направлении роста CP. Вертикальной точечной линией показан волновой вектор, передаваемый фотону при обратном рассеянии. Частоты на

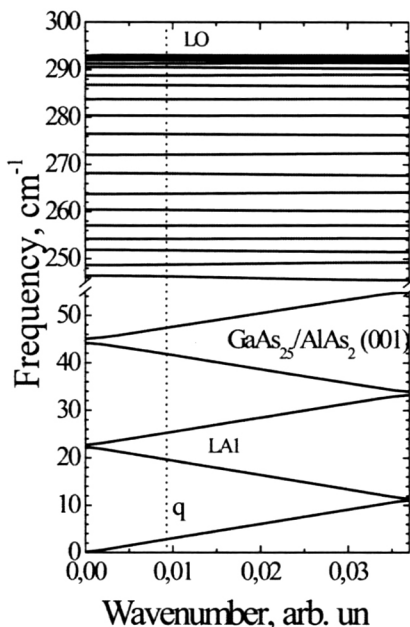


Рисунок 10. Рассчитанная дисперсия фононов в GaAs<sub>25</sub>/AlAs<sub>2</sub> CP.

пересечении этой линии с линиями дисперсии соответствует частотам пиков спектров КРС. Из сравнения расчетных (рис. 10) и экспериментальных данных (вставка к рис. 9) положения LA1 дублета видно их хорошее соответствие. Таким образом, исследуемая структура имеет хорошую периодичность, однако фонон-плазмонные моды в ней делокализованы. В данном случае туннельно-тонкой CP не работает ни «объемная» модель, ни «двумерная» модель, учитывающая образование 2D плазмонов. Чтобы выяснить, что играет большую роль в делокализации – туннельная прозрачность AlAs барьеров для электронов или их прозрачность для оптических фононов GaAs- типа, были проведены численные расчеты. Расчеты смещений атомов показывают, что оптические фононы GaAs- типа затухают с барьерами в 2 монослоя AlAs. Следовательно, наблюдаемая делокализация смешанных фонон-плазмонных мод в легированной GaS<sub>25</sub>/AlAs<sub>2</sub> CP обусловлена туннельной прозрачностью барьеров AlAs для электронов.

Параграф 4.2 посвящен легированным GaAs/AlAs CP с ультратонкими барьерами. В полярных полупроводниках продольные колебания создают макроскопическое электрическое поле. Влияние свободных электронов на частоты фононов заключается в том, что они экранируют это дальнodelствующее кулоновское поле. Для численного моделирования дисперсии связанных фонон-плазмонных мод в гетероструктурах со сложным фононным спектром была приложена следующая модель. Был разделен вклад локального и дальнodelствующего взаимодействия в динамическую матрицу:

$$D_{\alpha\beta,s,s'}(q) = D_{\alpha\beta,s,s'}^{\text{short}}(q) + D_{\alpha\beta,s,s'}^{\text{long}}(q), \quad (2)$$

локальное взаимодействие рассчитывалось в модели Борна, а дальнodelствующее кулоновское - в модели жестких ионов с учетом экранирования:

$$D_{\alpha\beta,s,s'}^{\text{long}}(q) = \frac{4\pi Z_s Z_{s'}}{V} \cdot \frac{1}{\sqrt{m_s \cdot m_{s'}}} \cdot \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2} \cdot \frac{1}{\varepsilon}, \quad (3)$$

где  $\alpha, \beta$  – координатные индексы (пробегают значения  $x, y, z$ ),  $s, s'$  – номера атомов в элементарной ячейке с массами  $m_s, m_{s'}$  соответственно,  $q$  – волновой вектор,  $V$  – объем элементарной ячейки,  $Z_s$  – эффективный заряд атома с номером  $s$ .

Для определения поляризуемости безстолкновительной плазмы (температура  $T$ ) в зависимости от волнового вектора  $q$  вдоль оси  $Z$  и от частоты известная формула Линдхарда [8] была несколько модифицирована:

$$\chi^0(q, \omega) = 2\sqrt{2} \frac{e^2}{\pi^2 \sqrt{m_x^{-1q} m_y^{-1q}} q \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\left( \frac{\sqrt{m_x^{-1q}} \hbar q}{\sqrt{k_b T}} + 2\sqrt{2}\xi \right) \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_f}{k_b T} - \xi^2 \right) \right]}{\left( \frac{m_x^{-1q} \hbar^2 q^2}{k_b T} + \frac{2\sqrt{2} \hbar q \sqrt{m_x^{-1q}}}{\sqrt{k_b T}} \xi \right)^2 - 4 \left( \frac{\hbar \omega}{k_b T} \right)^2} d\xi \quad (4)$$

Модификация формулы Линдхарда [8] позволяет исследовать зависимость дисперсии фонон-плазмонных мод от анизотропии эффективной массы. Учет столкновений осуществляется в подходе Линдхарда-Мермина [8]. Далее алгоритм вычислений был следующий. Вычислялась дисперсия «чистых» фононов без учета экранировки плазмонами. Затем частоты фононов рассчитывались с учетом экранирования. Так как экранировка сильно зависит от частоты, требовалось проводить процедуру перенормировки до схождения к самосогласованному решению.

Некоторые результаты расчетов представлены на рисунках 11 и 12. Интересно было исследовать анизотропию дисперсии фонон-плазмонных мод в зависимости от анизотропии эффективной массы. Для примера были рассчитаны дисперсии для GaAs<sub>2</sub>AlAs<sub>5</sub> (001) СР. «Тяжелая» эффективная масса  $(m^i)_y^{-1}$ , была либо  $4m^*$  (рис. 11), либо  $2m^*$  (рис. 12), масса  $(m^i)_y^{-1} = 1.8m^*$ , а  $(m^i)_x^{-1} = m^*$ . Прямыми линиями на рисунках 11 и 12 показаны частоты «чистых» фононов (не зависят от концентрации электронов) и частоты смешанных  $L^+$  и  $L^-$  мод в зависимости от концентрации электронов. Волновой вектор направлен либо вдоль оси  $X$  (непрерывная линия), либо вдоль оси  $Y$  (штриховая линия), значения волнового числа показаны на рисунках. Видно, что, во-первых, некоторые зависимости имеют  $Z$ -образную форму (самосогласованное решение неустойчиво). Во-вторых, заметная зависимость частоты фонон-плазмонной моды от направления волнового вектора появляется для волновых чисел  $10^6 \text{ см}^{-1}$  и более. При этом анизотропия эффективной массы не так уж велика (рис.12). Однако при квазиобратном рассеянии, даже при скользящем угле падения, максимальный импульс, передаваемый в плоскости, не

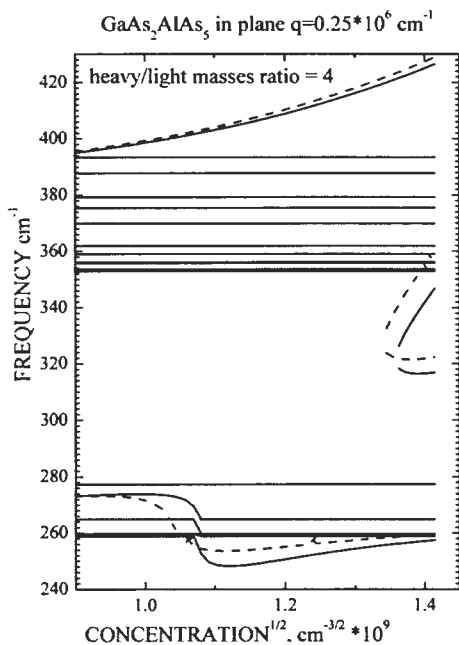


Рис. 11. Рассчитанная зависимость частоты фонов-плазмонных мод в  $\text{GaAs}_2\text{AlAs}_3$  (001) CP от концентрации электронов. Случай «малых» волновых чисел.

превышает  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ . Значит, для наблюдения эффектов анизотропии в плоскости структуры нужно использовать другую геометрию, например квазиобратное рассеяние с различных «торцов» пленки. Так как толщина исследуемых CP обычно не превышает 1 микрона, целесообразно в таком случае использование техники КРС с объективом микроскопа (micro-Raman technique). В работах [10] такой эксперимент был поставлен, и предсказанная в наших работах анизотропия была обнаружена.

### Основные результаты и выводы

1. Сравнение экспериментальных и рассчитанных спектров КРС показывает, что триплетная структура пика, соответствующая КРС в сверхрешетке  $\text{GaAs}_{0.6}/\text{AlAs}_5$ , выращенной методом молекулярно-лучевой эпитаксии на поверхности (001), реконструированной по типу (2x4), возникает вследствие латеральной локализации фононов в квантовых островках GaAs, формирующихся при субмонослойном покрытии поверхности (001) (2x4).

2. Анализ экспериментальных и теоретических спектров КРС, рассчитанных в

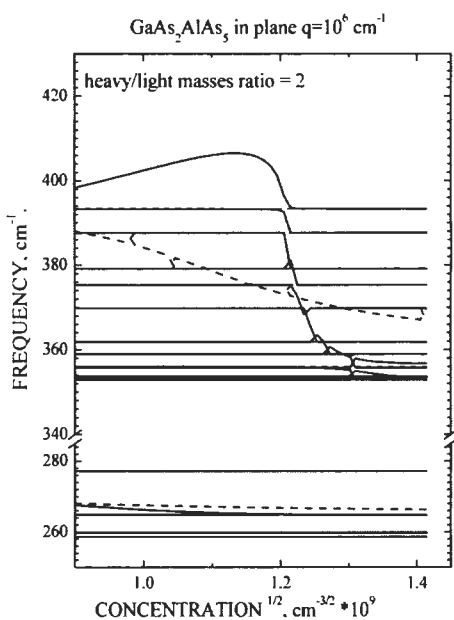


Рис.12. Рассчитанная зависимость частоты фонов-плазмонных мод в  $\text{GaAs}_2\text{AlAs}_3$  (001) CP от концентрации электронов. Случай «больших» волновых чисел.

приближении поляризуемости связи Волькенштейна, позволил определить распределение островков GaAs, формирующихся при субмонослойном покрытии поверхности (001) (2x4), по различным конфигурациям. Атомарная конфигурация островков совпадает с ранее известными результатами, полученными методом сканирующей туннельной микроскопии. Согласно расчетам, 70% островков содержат менее 12 атомов Ga.

3. С помощью численного эксперимента установлено, что в рамках имеющейся в литературе модели корrugации, расщепление ТО фононов в квантовых проволоках GaAs с ориентацией (311)А возможно при условии ограничения длины квантовых проволок. Это расщепление может служить характеризующим фактором при определении линейного размера реального квантового объекта вдоль направления  $[2\bar{3}3]$ . Для исследуемых образцов характерная длина проволок составляла ~4 nm.

4. Модельными расчетами установлено, что влияние корrugации гетерограниц на частоты фононов, локализованных в квантовых объектах, существенно, если средняя толщина этих объектов равна либо меньше масштаба корrugации.

5. Установлено, что в легированных CP GaAs<sub>17</sub>AlAs<sub>17</sub> электронный газ находится в двухмерном состоянии. С уменьшением толщины барьера AlAs до ультратонкого происходит делокализация фонон-плазмонного взаимодействия, которая обусловлена туннельной прозрачностью барьеров AlAs для свободных электронов.

6. Предложена модель и выполнены расчеты частот связанных фонон-плазмонных мод в гетероструктурах полярных полупроводников с учетом динамической экранировки плазмонами кулоновского взаимодействия. Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений спектров КРС позволяет бесконтактно оценивать концентрацию носителей заряда в гетероструктурах.

7. На основе модели фонон-плазмонного взаимодействия предложен способ исследования анизотропии эффективной массы свободных электронов из анализа дисперсии смешанных фонон-плазмонных мод в гетероструктурах полярных полупроводников.

**Основные результаты по теме диссертации отражены в 40-х публикациях (из них 13 статей). Основные публикации:**

A1. Сачков В.А. Латеральная локализация оптических фононов в квантовых островках GaAs / М.Д.Ефремов, В.А.Володин, В.А.Сачков, В.В.Преображенский, Б.Р.Семягин, В.В.Болотов, Е.А.Галактионов, А.В.Кретинин // Письма в ЖЭТФ. – 1999. – Т. 70, Вып. 2. – С. 73-79.

A2. Sachkov V.A. Reconstruction of GaAs/AlAs (311) and (100) interfaces: Raman study / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.V.Bolotov, V.A.Sachkov, G.A.Lubas, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin //Solid State Phenomena. – 1999. – Vols. 69-70. – P. 507-512.

A3. Сачков В.А. Исследование методом комбинационного рассеяния света расщепления ТО



фононов в сверхрешетках GaAs/AlAs выращенных на поверхностях (311)/В.А.Володин, М.Д.Ефремов, В.В.Преображенский, Б.Р.Семягин, В.В.Болотов, В.А.Сачков//ФТП-2000.-Т.34.-С.62-66.

A4. Сачков В.А. Исследование фонон-плазмонного взаимодействия в туннельных сверхрешетках GaAs/AlAs / В.А.Володин, М.Д.Ефремов, В.В.Преображенский, Б.Р.Семягин, В.В.Болотов, В.А.Сачков, Е.А.Галактионов, А.В.Кретинин // Письма в ЖЭТФ. – 2000. – Т. 71, Вып. 11. – С. 698-704.

A5. Sachkov V.A. Raman study of phonon-plasmon coupling modes in tunneling GaAs/AlAs SLs, grown on (311) and (001) surfaces / V.A.Volodin, M.D.Efremov, V.A.Sachkov, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin, E.A.Galakionov, D.A.Orehov // Nanotechnology. – 2001. – V. 12, N. 4. – P. 508-511.

A6. Sachkov V.A. Interface reconstruction in GaAs/AlAs ultrathin superlattices grown on (311) and (001) surfaces / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.A.Sachkov, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin, V.V.Bolotov, E.A.Galakionov, A.V.Kretinin // Nanotechnology. – 2001. – V. 12, N. 4. – P.421-424.

A7. Sachkov V.A. Phonon-plasmon interaction in tunnelling GaAs/AlAs superlattices grown on (311) and (100) substrates / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.A.Sachkov, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin, N.N.Ledentsov, V.M.Ustinov, D.Litvinov and D.Gerthsen // Solid State Phenomena. – 2002. – Vols. 82-84. – P. 581-586.

A8. Sachkov V.A. Raman study of GaAs quantum wires grown with partial filling of corrugated (311)A AlAs surfaces / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.A.Sachkov, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin, N.N.Ledentsov, V.M.Ustinov, I.P.Soshnikov, D.Litvinov, A.Rosenauer, D.Gerthsen // Microelectronic Journal. – 2002. – Vol 33, N.7. – P. 535-540.

A9. Sachkov V.A. Influence of electron mass anisotropy on phonon-plasmon coupling in short period GaAs/AlAs superlattices grown on (100), (311)B and (311)A nano-faceted surfaces / V.A.Volodin, M.D.Efremov, V.A.Sachkov, N.N.Ledentsov // Phys. Low-Dim. Struct. – 2003. – Vols. – 5-6. – P. 109-116.

A10. Sachkov V.A. Structure and photoluminescence study of type-II GaAs quantum wires and dots grown on nano-faceted (311)A surface / M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.A.Sachkov, V.V.Preobrazhenskii, B.R.Semyagin, D.V.Marin, R.S.Matvienko, N.N.Ledentsov, I.P.Soshnikov, D.Litvinov, A.Rosenauer, D.Gerthsen // Physica E – 2004. - Vol. 23, N.3-4. – P. 461-465.

A11. Interface reconstruction in GaAs/AlAs ultrathin superlattices grown on (311) and (001) surfaces/ M.D.Efremov, V.A.Volodin, V.V.Preobrazhenski, B.R.Semyagin, V.A.Sachkov, N.N.Ledentsov, V.M.Ustinov, I.P.Soshnikov, D.Litvinov, A.Rosenauer, D.Gerthsen // Trends in Nanotechnology Research / edited by Eugene V. Dirote. – New York: Nova Science Publishers Inc., 2004. – Chapter 7. – P.145-172.

A12. Phonon-plasmon coupling modes in tunneling thin GaAs/AlAs (311) and (001) SLs: Raman studies and modeling / V.A.Volodin, M.D.Efremov, V.A.Sachkov // Nanophysics, Nanoclusters and Nanodevices //edited by Kimberly S. Gehar. -New York:. Nova Science Publishers Inc., 2006. –Chapter

9. – P. 245-281.

А13. Сачков В.А. Делокализация фонон-плазмонных мод в сверхрешетках GaAs/AlAs с туннельно-тонкими барьерами AlAs / В.А.Володин, М.Д.Ефремов, В.А.Сачков // ЖЭТФ – 2006. – Т. 130, № 4. – С. 739-747.

### Цитируемая литература

1.Light Scattering in Solids V Superlattices and Other Microstructures./ edited by M.Cardona and G.Günterodt. - Berlin: Springer-Verlag, 1989. - 351 p.

2.Леденцов Н.Н. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. (Обзор) / Н.Н.Леденцов, В.М.Устинов, В.А.Щукин, П.С.Копьев, Ж.И.Алферов, Д.Бимберг // ФТП. – 1998. – Т. 32, Вып. 4. – С. 385-410.

3.Алферов Ж.И. Вырашивание квантовых кластеров GaAs-AlAs на ориентированных не по (100) фасетированных поверхностях GaAs методом молекулярно-пучковой эпитаксии/ Ж.И.Алферов, А.Ю.Егоров, А.Е.Жуков, С.В.Иванов, П.С.Копьев, Н.Н.Леденцов, Б.Я.Мельцер, В.М.Устинов // ФТП. – 1992. - Том 26, Вып. 10, С. 1715-1721.

4.Nötzel R. Direct synthesis of corrugated superlattices on non-(100)-oriented surfaces /R.Nötzel, N.N.Ledentsov, L.A.Däweritz, M.Hohenstein, K.Ploog // Phys. Rev. Lett. – 1991. – Vol. 67. – N. 27 – P. 3812-3815.

5.Hashizume Tomihiro. Structures of As-Rich GaAs(001)-(2x4) Reconstructions / Tomihiro Hashizume, Q.K. Xue, J. Zhou, A. Ichimiya, and T. Sakurai // Phys. Rev. Lett. – 1994. – Vol. 73. – N. 16. – P. 2208-2211.

6.Strauch D. Phonon dispersion in GaAs / D. Strauch and B. Dorner // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1990. – Vol. 2, N 6. – P. 1457-1474.

7.Ledentsov N.N. Interface structure and growth mode of quantumwire and quantum dot GaAs-AlAs structures on corrugated (311)A surfaces/N.N.Ledentsov, D.Litvinov, A.Rosenauer, D.Gerthsen, I.P. Soshnikov, V.A.Shchukin, V.M.Ustinov, A.Yu.Egorov, A.E.Zukov, V.A.Volodin, M.D.Efremov, V.V. Preobrazhenskii, B.P.Semyagin, D.Bimberg, And Zh.I.Alferov// J. of ELECTRONIC MATERIALS.- 2001. - Vol. 30, No. 5. P. 463-470.

8.Рассеяние света в твердых телах. Выпуск IV. Электронное рассеяние, спиновые эффекты, морфические эффекты. / Под ред. М.Кардоны и Г.Гюнтеродта. – М.: Мир, 1986.- 408с.

9.Sarma S. Das. Collective excitations in semiconductor superlattices / S. Das Sarma and J. J. Quinn // Phys. Rev. B. – 1982. – Vol. 25. – N. 12 – P. 7603-7618.

10.Володин В.А. Экспериментальное обнаружение анизотропии фонон-плазмонных мод в сверхрешетках GaAs/AlAs (100) // Письма в ЖЭТФ. – 2009. – Т. 89, Вып. 8. – С. 483-485.

Автореф. дисс. на соискание ученой степени кандидата физико–математических наук

Подписано в печать 10.11.2011. Заказ № 119.

Формат 60x84/16. Усл. печ. л. 1,0. Тираж 100 экз.

Типография Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН

